Szennyező anyag transzport áramló folyadékban.

2016-ban csak a 7., 8. oldalon olvasható peremfeltételről volt szó!!!

Bevezetés

Ha a szennyező anyag koncentrációját C [g/m^3], az áramló folyadék sebességvektorát $\boldsymbol{w}$, az időt t, a diffúziós együtthatót α jelöli, akkor a szennyező

konvektív fluxusa (anyagáram sűrűsége) $\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{w}\,C$ [g/(m^2·s)],

diffúziós fluxusa $\boldsymbol{q}_d = -\alpha\cdot\mathrm{grad}C$ [g/(m^2·s)].

A forrás nélküli instacionárius anyagtranszport egyenlet ekkor

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathrm{div}\,\boldsymbol{q}_k = \mathrm{div}\,\boldsymbol{q}_d = \mathrm{div}\left(\alpha\,\mathrm{grad}\,C\right).$$

Ha a diffúziós együttható a helynek nem függvénye, akkor az egyenlet jobb oldala átírható:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathrm{div}\,\boldsymbol{q}_k = \mathrm{div}\,\boldsymbol{q}_d = \alpha\,\mathrm{div}\left(\mathrm{grad}\,C\right) = \alpha\,\Delta C\,.$$

Ez utóbbi egyenlet egydimenziós áramlásban – a hely koordinátát x, az x-irányú állandó sebességet u jelöli

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = \alpha\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\,. \qquad (1)$$

2D áramlásban – a másik koordináta irány y, az y-irányú sebesség v

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} = \alpha\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right). \qquad (2)$$

Ha szilárd szennyező transzportja történik pl. ülepítő medencében, akkor az ülepedési sebességet v_s-sel jelölve a legutóbbi egyenlet jobb oldalán megjelenik egy forrástag, és a sebességkomponensek a helynek függvényei. Így az egyenlet alakja (y most a függőleges irányt jelöli):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial\left(uC\right)}{\partial x} + \frac{\partial\left(vC\right)}{\partial y} = \alpha\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) + v_s\frac{\partial C}{\partial y}\,.$$

Néhány tipikus vízszennyező anyag diffúziós együtthatóját és oldékonyságát (a telített oldatbeli koncentrációt) tartalmazza az alábbi táblázat:

Anyag	*α diffúziós együttható* [m^2/s]	*Oldékonyság* [g/100g víz]
$CaCl_2$	$110{,}8\cdot10^{-9}$	42,7
KCl	$74{,}5\cdot10^{-9}$	25,5
NaCl	$58{,}4\cdot10^{-9}$	26,3
Cl_2 gáz		0,7

Zárt alakú (analitikus) megoldások

Tekintsük az (1) egyenletet abban az esetben, ha a diffúziós együttható zérus, azaz a

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \qquad (3)$$

egyenletet. Ez állandó, például u = 1 m/s sebességű áramlás esetén (pl. összenyomhatatlan folyadék áramlása állandó keresztmetszetű csőben) egy hiperbolikus típusú másodrendű lineáris parciális differenciálegyenletre vezet. $\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} = 0\,.$

Az egyenletet a hely szerint deriválva $\frac{\partial^2 C}{\partial t \partial x}+\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=0$.

Az egyenlet idő szerinti deriváltja pedig $\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial t}=0$.

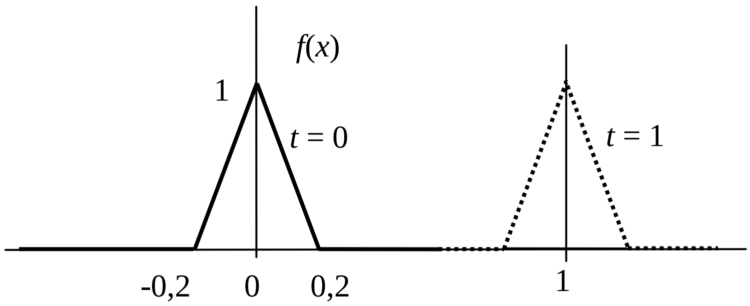
A két egyenletből a vegyes deriváltat kiküszöbölve $\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}-\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=0$, ami a rezgő húr differenciálegyenletével azonos. Ennek az egyenletnek a d'Alambert-féle általános megoldása $C(x,t)=f(x-t)$ tetszőleges differenciálható *f* függvény esetén.

Valóban $\frac{\partial C}{\partial t}=-f'(x-t)$ és $\frac{\partial C}{\partial x}=f'(x-t)$, ezek összege pedig kielégíti a (3) egyenletet.

Legyen a kezdeti feltétel például egy háromszöghullám:

$C(x,0)=f(x)=0$, ha x ≤ -0,2, $\quad f(x)=1+\frac{x}{0,2}$, ha - 0,2 ≤ x ≤ 0

$f(x)=1-\frac{x}{0,2}$, ha 0 ≤ x ≤ 0,2, $\quad$ végül $f(x)=0$, $\quad$ ha x ≥ 0,2.



Számolással ellenőrizhető, hogy a megoldás *t* = 1 esetén ugyanez a hullám az *x* = 1 abszcisszához eltolva, megfelelően az *u* = 1 m/s sebességnek.

A konvekció nélküli, tisztán diffúziós 1D egyenletnek (terjedés álló folyadékban, például egy csőben) is van zárt alakú megoldása.

Az egyenlet alakja ekkor $$\frac{\partial C}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Hasonlósági transzformációval bevezetünk egy új független változót, $\eta=\frac{x}{\sqrt{2\alpha t}}$, legyen a keresett *C* ennek a függvénye: $C = C(\eta)$. Ekkor $\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{dC}{d\eta}\cdot\frac{\partial\eta}{\partial t}=\frac{dC}{d\eta}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)\frac{x}{\sqrt{2\alpha\cdot t}\cdot t}=-\frac{dC}{d\eta}\frac{\eta}{2t}$.

Hasonlóan $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=\frac{d^2 C}{d\eta^2}\cdot\left(\frac{\partial\eta}{\partial x}\right)^2=\frac{d^2 C}{d\eta^2}\frac{1}{2\alpha\cdot t}$.

Ezeket beírva a (4) egyenletbe $-\frac{dC}{d\eta}\frac{\eta}{2t}=\alpha\cdot\frac{d^2 C}{d\eta^2}\frac{1}{2\alpha t}$, egyszerűsítések után $-\frac{dC}{d\eta}\eta=\frac{d^2 C}{d\eta^2}$.

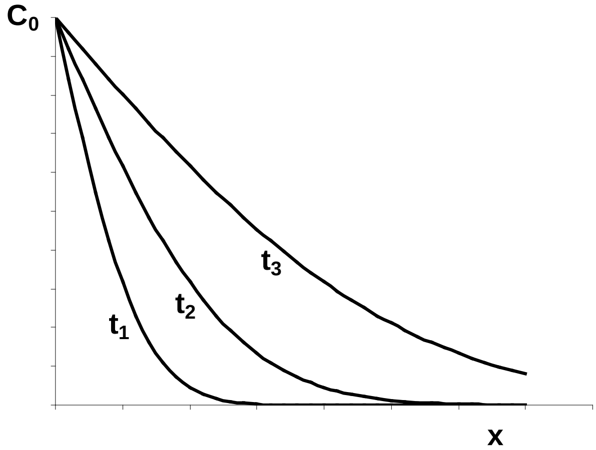
A $p=\frac{dC}{d\eta}$ új változót bevezetve $\frac{dp}{d\eta}=-p\eta$. Ez egy szétválasztható változójú másodrendű KDE.

Megoldása $\ln p=-\frac{\eta^2}{2}+k$, amiből $p=Ke^{-\frac{\eta^2}{2}}$ és ezt még egyszer integrálva

$C = K \int_{-\infty}^{\eta} e^{-\frac{\eta^2}{2}} d\eta + L$, itt felismerhető a normál eloszlású valószínűségi változó eloszlásfüggvénye.

Legyen a megoldandó probléma az x = 0 helyen membránnal két részre osztott cső. Baloldalt a koncentráció C_0, jobboldalt $C(x > 0, t = 0) = C(\eta = \infty) = 0$, ez a kezdeti feltétel. A membránt a t=0 pillanatban eltávolítjuk, ezzel az elsőfajú peremfeltétel $C(x = 0, t) = C(\eta = 0) = C_0$. Az általános megoldás konstansait ennek megfelelően választjuk meg. A számolás mellőzésével $C(x,t) = C_0 \cdot 2[1 - \Phi(\eta)] = C_0 \cdot 2\left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2\alpha t}}\right)\right]$, ahol $\Phi(\eta)$ jelöli a standard normál eloszlás eloszlásfüggvényét.

Ennek alapján a megoldás alakja három egymást követő időpontban ($t_1 < t_2 < t_3$):



Numerikus közelítés

Miután megismertük a pontos megoldást két speciális esetben, rátérünk a numerikus megoldási módok leírására. A helyet i alsó, az időt n felső indexszel jelöljük.

Az időszerinti differenciálhányados legegyszerűbb közelítése explicit, időben előrelépő (forward time = FT) sémával: $\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t}$.

A helyszerinti első és másodrendű derivált közelítése (másodrendű) centrális (centered space = CS) differenciasémával: $\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{C_{i+1}^n - C_{i-1}^n}{2\Delta x}$; $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2}$.

A hely szerinti első derivált közelítése „szélfelőli, avagy upwind” sémával: $\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x}$.

Ezek után felírható a diffúzió nélküli (3) egyenlet közelítése differenciaegyenlettel.

Az FTCS séma szerint: $\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u\frac{C_{i+1}^n - C_{i-1}^n}{2\Delta x} = 0$. Mint látni fogjuk, ez a numerikus közelítés feltétel nélkül instabilis megoldáshoz vezet.

Implicit, időben hátralépő sémát alkalmazva: $\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} = 0$. Ez feltétel nélkül stabilis numerikus megoldást eredményez.

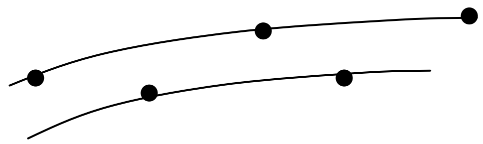
Az upwind sémát alkalmazva: $\dfrac{C_i^{n+1}-C_i^n}{\Delta t}+u\dfrac{C_i^n-C_{i-1}^n}{\Delta x}=0$. Ez feltételesen stabilis megoldásra vezet.

A koncentráció transzport egyenletében a diffúziós tag numerikus közelítése javítja a stabilitást. Ismét az FTCS közelítést alkalmazva az (1) egyenletre: $\dfrac{C_i^{n+1}-C_i^n}{\Delta t}+u\dfrac{C_{i+1}^n-C_{i-1}^n}{2\Delta x}=\alpha\dfrac{C_{i+1}^n-2C_i^n+C_{i-1}^n}{\Delta x^2}$. A tömörebb jelölés érdekében szorozzuk végig az egyenletet az időlépéssel és vezessük be a $\sigma=\dfrac{u\Delta t}{\Delta x}$; $\beta=\dfrac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}$ jelöléseket. Ekkor az iménti egyenlet alakja:

$$C_i^{n+1}-C_i^n+\frac{\sigma}{2}\left(C_{i+1}^n-C_{i-1}^n\right)=\beta\left(C_{i+1}^n-2C_i^n+C_{i-1}^n\right). \qquad (5)$$

Az explicit sémák alkalmazásának előnye, hogy a kezdeti értékből kiindulva minden időlépésben minden helyen a megoldás ismert értékek lineáris kombinációjaként számolható. Hátrányuk, hogy – jó esetben – feltételesen stabilisak, az időlépés nem lehet nagyobb egy küszöb értéknél.

Az implicit séma előnye a stabilitás, hátránya, hogy minden időlépésben egy annyi ismeretlenes egyenletet kell megoldani, ahány pontban keressük a koncentráció eloszlást. Egydimenziós esetben a megoldandó egyenletrendszer együtthatómátrixa tridiagonál mátrix (a főátló és a mellette lévő két mellékátló tartalmaz csak nem zérus elemeket) kétdimenziós probléma esetén még két távolabbi mellékátlóban is vannak nem zérus elemek. A tridiagonál mátrix invertálása könnyű, a fejezet végén erről lesz szó. Az implicit séma – stabilitása mellett – veszélyt is hordoz, mert helyben centrális differencia közelítés esetén az egymás melletti rácspontbeli értékek „elválhatnak” egymástól. Minden páros indexű érték különbsége, illetve minden páratlan indexű érték különbsége lehet akkor is azonos, ha az egymás melletti értékek oszcillálnak, lásd a rajzot! A megoldás két sima görbe között ugrál.



Stabilitásvizsgálat

A numerikus sémák stabilitás vizsgálatának egyik módszerét a magyar származású Neumann János dolgozta ki, ezt mutatjuk be. Jelölje az (5) típusú differenciaegyenlet pontos megoldását $\overline{C}_i^n$, az egyenlet hibás, közelítő megoldását pedig C_i^n. A hiba tehát $\varepsilon_i^n=C_i^n-\overline{C}_i^n$. Innen $C_i^n=\overline{C}_i^n+\varepsilon_i^n$. Írjuk ezt vissza az (5) egyenletbe és legyen egyelőre β = 0, azaz a diffúzió nélküli egyenletet tekintsük:

$\overline{C}_i^{n+1}-\overline{C}_i^n+\varepsilon_i^{n+1}-\varepsilon_i^n+\dfrac{\sigma}{2}\left(\overline{C}_{i+1}^n-\overline{C}_{i-1}^n+\varepsilon_{i+1}^n-\varepsilon_{i-1}^n\right)=0$. Mivel $\overline{C}_i^n$ pontos megoldása az egyenletnek, így az összes felülhúzással jelölt tag együttesen éppen kiesik, és az marad, hogy

$\varepsilon_i^{n+1}-\varepsilon_i^n+\dfrac{\sigma}{2}\left(\varepsilon_{i+1}^n-\varepsilon_{i-1}^n\right)=0$, tehát a hiba ugyanazt az egyenletet elégíti ki, mint a keresett pontos numerikus megoldás. A hibaegyenlet rendezése után kapjuk, hogy

$$\varepsilon_i^{n+1}=\varepsilon_i^n-\frac{\sigma}{2}\left(\varepsilon_{i+1}^n-\varepsilon_{i-1}^n\right)=\frac{\sigma}{2}\varepsilon_{i-1}^n+\varepsilon_i^n-\frac{\sigma}{2}\varepsilon_{i+1}^n. \qquad (6)$$

Jelölje az n-edik időlépésben a megoldás egyes rácspontokban létrejött hibáiból álló vektort $\boldsymbol{\varepsilon}^{n}$, a (6) hibaegyenlet együtthatóiból felépített mátrixot pedig A! Az új időlépésbeli $\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}$ hibavektor ekkor

$$\begin{pmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \varepsilon_i^{n+1} \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sigma/2 & 1 & -\sigma/2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cdot \\ \varepsilon_{i-1}^{n} \\ \varepsilon_i^{n} \\ \varepsilon_{i+1}^{n} \\ \cdot \end{pmatrix}$$

, azaz tömören $\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1}=A\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{n}$. A kezdeti feltételekből kiindulva az első időlépés után már hiba terheli a megoldást: $\boldsymbol{\varepsilon}^{1}$. A második lépés után a hiba $\boldsymbol{\varepsilon}^{2}=A\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{1}$, a harmadik lépés után $\boldsymbol{\varepsilon}^{3} = A\cdot A\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{2} = A^{2}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{2}$. Az n+1-edik lépésben tehát $\boldsymbol{\varepsilon}^{n+1} = A^{n}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}^{n}$. Ahhoz, hogy a hiba ne nőjön határtalanul, szükséges, hogy az A mátrix n-edik hatványának normája (ami az abszolút érték megfelelője mátrixok esetében) korlátos legyen: $\left\| A^{n} \right\| \overset{!}{\leq} K$.

Feltehető, hogy a hibavektor, mint a hely függvénye Fourier-sorba fejthető. Ehhez az kell, hogy a hely periodikus függvénye legyen. A megoldást a $0 \leq x \leq L$ tartományban keressük. Mivel a peremfeltételek nem feltétlenül periodikus függvények, azaz $C(0) \neq C(L)$, így a $0 \leq x \leq L$ tartományt tükrözni kell az origóra, hogy biztosan periodikus függvényt kapjunk. A $-L \leq x \leq L$ tartományon a legnagyobb hullámhosszú periodikus függvény hullámhossza éppen $\lambda_{\max} = 2L$. A legkisebb, még a numerikus sémában ábrázolható hullám hullámhossza pedig $\lambda_{\min} = 2\Delta x$. Az L csőhosszat N részre osztjuk, egy rész hossza $\Delta x = L/N$. Az ezeknek a hullámoknak megfelelő $k = 2\pi/\lambda$ hullámszámok:

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{2L} = \frac{\pi}{L}; \qquad k_{\max} = \frac{2\pi}{2\Delta x} = \frac{\pi}{\Delta x} = \frac{\pi}{L/N} = N\frac{\pi}{L} = N \cdot k_{\min}. \tag{7}$$

Az n-edik időlépésben a hiba, mint a hely periodikus függvénye komplex alakban Fourier sorral az alábbi módon írható fel – az imaginárius egység $j = \sqrt{-1}$:

$$\varepsilon^{n}(x_i) = \sum_{\nu=-N}^{N} E_{\nu}^{n} e^{j\cdot k_{\nu} x} = \varepsilon^{n}(i\cdot\Delta x) = \sum_{\nu=-N}^{N} E_{\nu}^{n} e^{j\cdot k_{\nu}\cdot i\Delta x}. \tag{8}$$

(7) és (8) egybevetéséből látszik, hogy a ν-edik hullám hullámszáma $k_{\nu} = \nu\cdot\pi/L$, így a (8) képletbeli kitevőben szereplő $k_{\nu}\,\Delta x = \nu\cdot\pi/L\cdot(L/N) = \nu\cdot\pi/N = \Phi$, a π szög ν/N-ed része. Ezt visszaírva (8)-ba

$$\varepsilon^{n}(x_i) = \sum_{\nu=-N}^{N} E_{\nu}^{n} e^{j\cdot k_{\nu}\cdot i\Delta x} = \sum_{\nu=-N}^{N} E_{\nu}^{n} e^{j\cdot i\cdot\Phi}. \tag{9}$$

A (9) összefüggést a megfelelő indexekkel beírhatjuk a (6) hibaegyenletbe. Miután véges összegekről van szó, elegendő azok egyetlen tagját leírni, mert az ugyanúgy terjed a hely és idő függvényében, mint a teljes hiba. Ha ezek után a ν indexet el is hagyjuk, kapjuk, hogy

$$E^{n+1}e^{ji\Phi} = \frac{\sigma}{2}E^{n}e^{j(i-1)\Phi} + E^{n}e^{ji\Phi} - \frac{\sigma}{2}E^{n}e^{j(i+1)\Phi} = E^{n}e^{ji\Phi}\left(\frac{\sigma}{2}e^{-j\Phi} + 1 - \frac{\sigma}{2}e^{j\Phi}\right).$$

Egyszerűsíthetünk az exponenciális függvénnyel és végigosztunk E^{n} –nel, akkor megkapjuk a komplex erősítési viszonyt:

$$G \overset{jel}{=} \frac{E^{n+1}}{E^{n}} = \frac{\sigma}{2}e^{-j\Phi} + 1 - \frac{\sigma}{2}e^{j\Phi} = 1 + \frac{\sigma}{2}\left(e^{-j\Phi} - e^{j\Phi}\right).$$

A komplex számok exponenciális alakja átírható trigonometrikus formába: $e^{j\Phi} = \cos\Phi + j\sin\Phi; e^{-j\Phi} = \cos\Phi - j\sin\Phi$, ezekkel a zárójeles kifejezés -2$j$sinΦ, végül $G = 1 - j\sigma \sin \Phi$. Ennek a komplex számnak az abszolút értéke a valós és a képzetes részek négyzetösszegének négyzetgyöke:

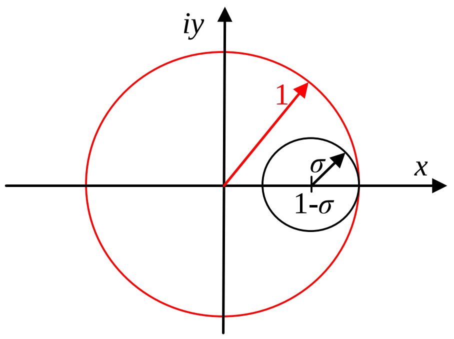
$$|G| = \sqrt{\left(1^2 + \sigma^2 \sin^2 \Phi\right)} \geq 1. \tag{10}$$

Ezzel beláttuk, hogy a diffúzió nélküli, tisztán konvektív transzportegyenletre felírt FTCS séma feltétel nélkül instabilis.

Az upwind séma fent leírt $\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u\frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} = 0$ egyenlete átalakítás után $C_i^{n+1} = (1-\sigma)C_i^n + \sigma C_{i-1}^n$. A hibaegyenlet amplitúdójára vonatkozó megfelelő egyenlet $E^{n+1} = (1-\sigma)E^n + \sigma E^n e^{-j\Phi}$, így a komplex erősítés

$$G = (1-\sigma) + \sigma e^{-j\Phi} = 1 - \sigma + \sigma \cos \Phi - j\sigma \sin \Phi.$$

Innen $|G|^2 = (1 - \sigma + \sigma \cos \Phi)^2 + (\sigma \sin \Phi)^2$. Mivel G egy a komplex síkon felírt 1-σ középpontú σ sugarú kör, így akkor lesz G abszolút értéke egynél kisebb, ha ez a kör az egységkör belsejében fekszik, ennek pedig σ < 1 a feltétele. Ez a Courant-Friedrichs-Lewy kritérium, σ neve pedig Courant-szám.



Hasonló módon, de az eddigieknél lényegesen több számolással adódik a konvekciós-diffúziós egyenletre felírt FTCS séma stabilitásának feltétele, $\beta \leq \frac{1}{2}$ és $\frac{\sigma^2}{\beta} \leq 2$, amiből végül:

$$\Delta t \leq \min\left\{\frac{2\alpha}{u^2}; \frac{\Delta x^2}{2\alpha}\right\}. \tag{11}$$

A numerikus sémák stabilitásvizsgálata után a kezdeti és peremfeltételeket tárgyaljuk.

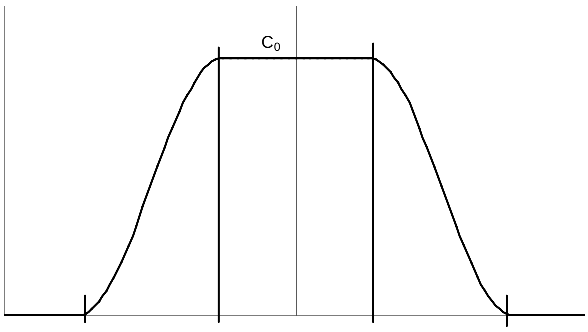
Kezdeti feltétel

A zárt alakú megoldások tárgyalása során már láttuk, hogy lehetséges kezdeti feltétel egy szennyezett folyadéktartomány az egyébként tiszta folyadékban. Az ott leírt háromszögfüggvény nem realisztikus, ehelyett valószínűbb, hogy a koncentráció kezdetben a hely folytonos és differenciálható függvénye. Legyen például – a helykoordináta origójába helyezve a szennyezett folyadéktér középpontját – a kezdeti eloszlás

$C = 0$, ha $x \leq -a - r$; $\quad C = \frac{C_0}{2}\left(1 + \cos\left(\pi \frac{x+a}{r}\right)\right)$, ha $-a - r \leq x \leq -a$;

$C = C_0$, ha $-a \leq x \leq a$;

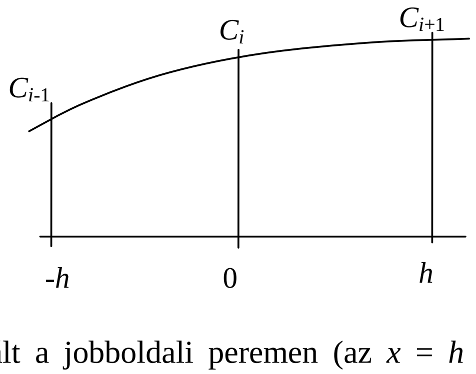
$C = \frac{C_0}{2}\left(1 + \cos\left(\pi \frac{x-a}{r}\right)\right)$, ha $a \leq x \leq a + r$; $\quad C = 0$, ha $x \geq a + r$.



Az analitikus megoldások másik kezdeti feltétele, a t = 0 pillanat előtt membránnal elválasztott két folyadéktér valóban reális kezdeti feltétel, a koncentráció 0 vagy C_0 aszerint, hogy a membrán melyik oldalán van a vizsgált pont.

Peremfeltételek

Alapvetően első vagy másodfajú peremfeltételeknek van fizikai értelme.
Az elsőfajú peremfeltétel azt jelenti, hogy a koncentráció a peremen adott: $C(x = 0) = C_0$, illetve $C(x = L) = C_1$. Kétdimenziós esetben ugyanilyen peremfeltétel írható elő.
A másodfajú peremfeltétel azt jelenti, hogy a diffúziós fluxus, azaz a koncentráció gradiense adott. Például 0 a peremen: $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$. Kérdés, hogyan lehet ezt a differenciaegyenletben figyelembe venni. Az (1) differenciálegyenlet $\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = \alpha\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$. Az L csőhosszat N darab $\Delta x = L/N$ hosszú szakaszra osztva az $i\Delta x$ (i = 1, 2, …, N-1) belső pontokban a centrális differenciaséma alkalmazható. A perempontban és a perem melletti pontban a másodrendű parciális differenciálhányados differenciaközelítésében a cső elején szerepel C_0, a cső végén C_N. Ezeket kell a közeli pontok koncentrációjával kifejezni. Fektessünk át egy másodrendű interpolációs polinomot a peremponton és a két szomszédos ponton. Az interpolációs polinom egyenlete $C = ax^2 + bx + c$. Ha a $h = \Delta x$ egyenközű pontok lokális koordinátarendszerben felírt abszcisszái: -h, 0, h, az ordináták (koncentrációk) ezekben a pontokban C_{i-1}, C_i, C_{i+1}, akkor számolással ellenőrizhető, hogy a polinom egyenlete $C = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{2h^2}x^2 + \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}x + C_i$. Innen deriválással kapjuk, hogy $\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{h^2}x + \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}$. Ennek értékét a peremen ismerjük, hiszen ez a másodfajú peremfeltétel.



Legyen például ez a derivált a jobboldali peremen (az x = h helyen) zérus (nincs diffúz transzport). Ekkor $0 = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{h} + \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}$. Innen

$$C_{i+1} = \frac{4C_i - C_{i-1}}{3}. \tag{12}$$

Látjuk tehát, hogy az ismeretlen peremérték kifejezhető a perem közeli értékekkel. A (12) eredményt figyelembe vehetjük a differenciaegyenletekben. Három helyen fordul elő az FTCS séma esetén.

- Az első deriváltban a perem melletti pontban, itt közelítése $\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{2}{3}\frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x}$ (12) miatt. (A perempontban ismerjük értékét, hiszen ott a másodfajú peremfeltétel éppen az, hogy a derivált adott, például zérus.),
- a második deriváltban a perem melletti pontban, melynek közelítése: $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2}$. Ide beírva (12)-t kapjuk, hogy $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{2}{3}\frac{C_{i-1} - C_i}{\Delta x^2}$,
- a második derivált centrális közelítésében a perempontban pedig az interpolációs polinom olyan parabola, melynek *h* abszcisszájú pontja nem fekszik a vizsgált tartományban, de a 0 pontra vett szimmetria miatt C_{i+1} fiktív értéke azonos C_{i-1} –gyel, ezért ott $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta x^2} = 2\frac{C_{i-1} - C_i}{\Delta x^2}$.

Kétdimenziós probléma esetén, például egy párhuzamos falú csatornában történő áramlás esetén a csatornafalra merőleges konvektív és diffúziós transzport zérus. Előbbi azért, mert a falra merőleges sebesség zérus, utóbbi azért, mert a falon át nem lehet diffúzió.

Transzport folyamatok hasonlósága

Dimenziótlanítsuk az (1) parciális differenciálegyenletet! Legyen a hosszlépték a cső *L* hossza, a sebességlépték a csőbeli *U* átlagsebesség, a koncentráció léptéke a maximális kezdeti C_0 koncentráció, az időlépték egyelőre egy tetszőleges *T* idő! A dimenziótlan mennyiségeket *-gal jelölve $x = Lx^*$, $u = Uu^*$, $C = C_0C^*$, $t = Tt^*$. Ezekkel az (1) egyenlet így írható: $\frac{C_0}{T}\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + U\frac{C_0}{L}u^*\frac{\partial C^*}{\partial x^*} = \alpha\frac{C_0}{L^2}\frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}}$. Osszuk végig az egyenletet $\alpha\frac{C_0}{L^2}$-tel, ekkor azt kapjuk, hogy $\frac{L^2}{T\alpha}\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + \frac{LU}{\alpha}u^*\frac{\partial C^*}{\partial x^*} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}}$. A két jellemző dimenziótlan szám a Péclet szám: $Pé = \frac{LU}{\alpha}$, illetve az egyelőre még ismeretlen $\frac{L^2}{T\alpha}$. Két lehetőségünk van.

- Ha a diffúzió mellett a konvekció elhanyagolható $T_1 = \frac{L^2}{\alpha}$, ekkor a folyamat egyetlen dimenziótlan szám, a *Pé* szám alapján modellezhető így: $\frac{\partial C^*}{\partial t^*} + Pé \cdot u^*\frac{\partial C^*}{\partial x^*} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}}$.
- Ha a konvekció mellett a diffúzió elhanyagolható, akkor $T_2 = \frac{L}{U}$, ekkor a folyamat szintén a *Pé* szám alapján modellezhető, de most így: $Pé \cdot \frac{\partial C^*}{\partial t^*} + Pé \cdot u^*\frac{\partial C^*}{\partial x^*} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}}$.

Tridiagonál mátrix LU felbontása

Egy dimenziós feladatok esetén az implicit módszer sávmátrixú (úgynevezett tridiagonál mátrixú) egyenletrendszer megoldására vezet. Mint láttuk

$C_i^{n+1}+\frac{\sigma}{2}\left(C_{i+1}^{n+1}-C_{i-1}^{n+1}\right)-\beta\left(C_{i+1}^{n+1}-2C_i^{n+1}+C_{i-1}^{n+1}\right)=C_i^n$. Az együttható mátrix alakja tehát

$$\begin{pmatrix} . & . & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sigma}{2}-\beta & 1+2\beta & \frac{\sigma}{2}-\beta & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sigma}{2}-\beta & 1+2\beta & \frac{\sigma}{2}-\beta & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sigma}{2}-\beta & 1+2\beta & \frac{\sigma}{2}-\beta \\ 0 & 0 & 0 & . & . \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e_1 & f_1 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & e_2 & f_2 & 0 & 0 \\ 0 & d_3 & e_3 & f_3 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . \end{pmatrix}.$$

A d, e, f elemeket tartalmazó négyzetes A mátrix két egyszerűbb mátrix, egy L alsó és egy U felső mátrix szorzataként írható fel: $A = L \cdot U$.

$$A=\begin{pmatrix} e_1 & f_1 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & e_2 & f_2 & 0 & 0 \\ 0 & d_3 & e_3 & f_3 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & e_n \end{pmatrix}=L\cdot U=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} u_1 & f_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_2 & f_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_3 & f_3 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_n \end{pmatrix}.$$

Ha formálisan összeszorozzuk a két háromszögmátrixot és a kapott kifejezéseket egyenlővé tesszük az eredeti A mátrix együtthatóival, akkor a következő rekurziós képleteket kapjuk:

$u_1=e_1$, $\qquad l_2=\frac{d_2}{u_1}$,

$u_2=e_2-l_2f_1$, $\qquad l_3=\frac{d_3}{u_2}$,

…, $\qquad$ …,

$u_{n-1}=e_{n-1}-l_{n-1}f_{n-2}$, $\qquad l_n=\frac{d_n}{u_{n-1}}$,

$u_n=e_n-l_nf_{n-1}$.

A megoldás ezek után igen egyszerű. Az n-edik időlépésben már ismert C_i^n koncentrációkból álló oszlopvektort röviden $\boldsymbol{C^n}$-nel jelöljük. Ekkor $\boldsymbol{C^n} = A\cdot\boldsymbol{C^{n+1}} = L\cdot(U\,\boldsymbol{C^{n+1}}) = L\cdot\boldsymbol{y}$. Innen első lépésben $\boldsymbol{y} = L^{-1}\cdot\boldsymbol{C^n}$ és a fenti alakú alsó háromszögmátrixú egyenletrendszer megoldása felülről lefelé haladva azonnal adódik. Második lépésben pedig $U\,\boldsymbol{C^{n+1}} = \boldsymbol{y}$, azaz $\boldsymbol{C^{n+1}} = U^{-1}\,\boldsymbol{y}$, ismét háromszögmátrixú az egyenletrendszer, de most alulról felfelé oldjuk meg. Vegyük észre, hogy az $L\cdot U$ felbontást csak egyszer kell elvégezni, időlépésenként csak az utóbbi két egyszerű megoldás a feladat az – időben változó – jobboldallal.